

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	大学院 電気通信学 学研究科 電子工学 専攻 博士前期課程		
氏 名	植田 啓史	学籍番号	0832007
論 文 題 目	Er ₂ SiO ₅ の結晶構造と電子状態評価		
<p>要 旨</p> <p>Er₂SiO₅結晶は室温でシリカ系ファイバーの最低損失波長 1.5μm帯で鋭い発光を持ち、シリコンフォトニクスの中核材料として有望な発光材料の一つである。希土類であるErは 4f軌道に電子が完全に充填されないうちに外側にある軌道に電子が入っていく性質がある。Erイオンの発光は不完全充填による 4f電子内殻遷移に起因する。一方、完全なEr₂SiO₅結晶の作製は難しく、Er₂SiO₅単結晶の構造や電子状態の詳細はわかっていない。本研究では、物性予測に威力を発揮してきた密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を用いて、Er₂SiO₅結晶の構造安定性と電子状態の評価を行った。</p> <p>Er₂SiO₅結晶中ではErの電子は 4f電子が 1 つ励起したイオンとして振る舞うことでその電子状態を表すことが出来る。Er₂SiO₅結晶の原子配列はSiO₂の結合とEr₂O₃の結合に分けられる。伝導帯端はErのd軌道、価電子帯端はSi-Oの結合軌道で構成されていることがわかった。これは伝導体からの電子の遷移に、価電子帯端は影響を受けず発光母材として優れているといえる。</p> <p>Er₂SiO₅結晶から酸素欠損が生じたモデルでは格子定数に違いはでないが電子状態は大きく変化した。酸素欠損によりバンドギャップに電子が占有している欠陥準位が現れ、欠損する酸素原子によって欠陥準位のエネルギーが異なる。Si原子近傍のO原子が欠損すると欠陥準位はSi-Oの混成軌道になり、欠陥準位は価電子帯端に近くなる。Si原子から離れたO原子を欠損すると欠陥準位にErのd軌道が現れ、欠陥準位は伝導帯端に近づく。酸素欠損が生じる場合、エネルギー的にはSi原子から離れているO原子が脱離した方が安定している。このため酸素欠損により伝導帯に存在するd電子が欠陥準位にトラップされる可能性がある。</p> <p>本研究ではEr₂SiO₅の結晶構造とその電子状態を解明した。また結晶の作製過程で酸素欠損がおきる可能性を考慮に入れ、酸素欠損モデルによる原子配列と電子状態を評価した。酸素欠損により欠陥準位が生じるため、結晶作製においてEr₂SiO₅の完全結晶は重要である。酸素欠損の割合が増えればバンドギャップに欠陥準位が増えるため、光学デバイス作製において重要な問題が生じる可能性がある。</p>			